

УДК 544.015.35: 004.942

**В.В. Каверинський, З.П. Сухенко, Г.А. Баглюк***Інститут проблем матеріалознавства***МОДЕЛЮВАННЯ КІНЕТИКИ ПРОЦЕСІВ РЕКРИСТАЛІЗАЦІЇ, ПОВЕРНЕННЯ І ВИДІЛЕННЯ КАРБОНІТРИДНИХ ЧАСТИНОК У МІКРОЛЕГОВАНИЙ СТАЛІ ПІСЛЯ ГАРЯЧОЇ ДЕФОРМАЦІЇ АУСТЕНІТУ**

*Розроблено комп'ютерну модель, що описує процеси повернення і рекристалізації аустеніту у сталях мікролегованих карбонітридоутворюючими елементами. Особливістю моделі є врахування взаємного зв'язку рекристалізації і повернення з виділенням дисперсних частинок. Модель використовується для передбачення відразу декількох характеристик: кінетики рекристалізації, зміни з плином часу щільності дислокацій, зміни середнього розміру деформованого аустенітного зерна, динаміку зміни кількості і середнього розміру карбонітридних частинок, а також їх склад. Врахування стехіометричного складу карбонітридних частинок, який отримуються за рахунок термодинамічного розрахунку, є досить суттєвою особливістю нашої моделі, що вирізняє її серед аналогів. У даній роботі представлений приклад використання розробленої моделі для опису структуроутворення при деформаційно-термічній обробці низьковуглецевої сталі.*

*Ключові слова:* комп'ютерна модель, рекристалізація, повернення, карбонітриди, аустеніт, сталь.

**V.V. Kaverinskiy, Z.P. Sukhenko, G.A. Bagluk****MODELING OF THE KINETICS OF RECRYSTALLIZATION PROCEDURES, RETURN AND PRECIPITATION OF CARBONITRID PARTICLES IN MICRO-ALLOYED STEEL AFTER HOT DEFORMATION OF AUSTENITE**

*A computer model was developed that describes the processes of the return and recrystallization of austenite in steels of micro-alloyed by carbonitride forming elements. The peculiarity of the model is the consideration of the reciprocal connection of recrystallization and return with the allocation of dispersed particles. The model is used to predict many characteristics at once: recrystallization kinetics, changes over time of dislocation density, changes in the average size of deformed austenitic grains, dynamics of changes in the number and average size of carbonitride particles, as well as their composition. The consideration of the stoichiometric composition of carbonitride particles obtained by thermodynamic calculation is a very significant feature of our model that distinguishes it from analogues. In this paper an example of the use of the developed model for describing the structure formation during thermal-deformation treatment of low carbon steel is presented.*

*Keywords:* computer model, recrystallization, return, carbonitride, austenite, steel.

**В.В. Каверинский, З.П. Сухенко, Г.А. Баглюк****МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССОВ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ, ВОЗВРАТА И ВЫДЕЛЕНИЯ КАРБОНИТРИДНЫХ ЧАСТИЦ В МИКРОЛЕГИРОВАННОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ ГОРЯЧЕЙ ДЕФОРМАЦИИ АУСТЕНИТА**

*Разработана компьютерная модель, описывающая процессы возврата и рекристаллизации аустенита в сталях микролегированных карбонитридоутвообразующими элементами. Особенностью модели является учет взаимной связи рекристаллизации и возврата с выделением дисперсных частиц. Модель используется для предсказания сразу несколько характеристик: кинетики рекристаллизации, изменения с течением времени плотности дислокаций, изменения среднего размера деформированного аустенитного зерна, динамику изменения количества и среднего размера карбонитридных частиц, а также их состав. Учет стехиометрического состава карбонитридных частиц, получаемый при помощи термодинамического расчета, является достаточно существенной особенностью нашей модели, которая выделяет ее среди аналогов. В данной работе представлен пример использования разработанной модели для описания структурообразования при деформационно-термической обработке низкоуглеродистой стали.*

*Ключевые слова:* компьютерная модель, рекристаллизация, возврат, карбонитриды, аустенит, сталь.

**Постановка проблеми.** У технології деформаційно-термічної обробки сталей визначну роль відіграють процеси рекристалізації деформованого аустенітного зерна. Саме вони ведуть до його подрібнення. У мікролегованих сильними карбонітридоутворюючими елементами сталях на цей процес також накладається утворення дисперсних карбонітридних фаз. Ці карбонітриди сповільнюють рекристалізацію, але на кінетику їх виділення впливає щільність дислокації, що залежить від ступеня дефлорації і зменшується за рахунок повернення. Проведення натурних експериментів, здатних врахувати вказані процеси є задачею, яка потребує дорогих досліджень і спеціального обладнання. Таким чином, розробка математичної моделі і її комп'ютерної реалізації, що здатна описати кінетику вказаних процесів представляється актуальною задачею, що здатна суттєво скоротити кількість експериментальних досліджень. При цьому пріоритет віддається фізично класу обґрунтованих математичних моделей, що можуть проникнути у сутність процесів і являють більш гнучкий інструмент у порівнянні з суто емпіричними моделями.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Широковідомими є процеси рекристалізації при яких відбувається зростання зерна. Але процеси рекристалізації, що мають місце при гарячій деформації аустеніту задні вести до подрібнення зерна за рахунок утворення на місці деформованого (сплющеного, витягнутого) зерна великої кількості глобулярних зерен меншого розміру. Цей процес лежить в основі високотемпературної деформаційно-термічної обробки сталі. Розрізняють динамічну, мета динамічну і статичну рекристалізацію.

Динамічна рекристалізація розвивається в процесі деформації матеріалу. У зв'язку з цим, для цього виду рекристалізації потрібні високі температури і низька швидкість деформації. Для початку динамічної рекристалізації необхідна критична ступінь деформації,  $\varepsilon_c$ , величина якої залежить від температури, швидкості деформації і хімічного складу сталі. У процесах гарячої прокатки даний вид рекристалізації можливий на її чорновій стадії (у чорнових клітках), що характеризується максимальною температурою і низькими швидкостями деформації [1].

Метадинамічна (або постдинамічна) рекристалізація характеризується тим, що динамічна рекристалізація, що почалася при недостатньо високому ступені деформації, проходить не до кінця, а матеріал остаточно рекристалізується в процесі післядеформаційної витримки. Вказаний вид рекристалізації суттєво відрізняється від статичної в силу того, що відразу після деформації у матеріалі вже містяться сформовані зародки рекристалізованих зерен, які в подальшому можуть зростати, забезпечуючи завершення процесу.

Динамічна рекристалізація супроводжується сильним зниженням міцності деформованого матеріалу. Її розвиток приводить до характерної форми кривих пластичного плину, що мають виражені піки [1]. Формування первинних зародків динамічно рекристалізованих зерен відбувається на границях вихідних зерен аустеніту. Цей факт пояснює залежність величини критичної деформації від розміру вихідного зерна.

Для кількісного опису росту частки динамічно рекристалізованого об'єму в залежності від деформації після досягнення її критичного значення ( $\varepsilon > \varepsilon_c$ ) в роботах [2 – 6] використовують рівняння типу Аврамі наступного виду:

$$X_{DRX} = 1 - e^{-k \cdot (\varepsilon - \varepsilon_c)^n} \quad (1)$$

де  $k$  та  $n$  – емпіричні параметри, значення яких залежать від температури, швидкості деформації і хімічного складу сталі.

Типове значення параметру  $n$  з формули (1) для мікролегованих сталей становить від 1 до 2.

Критична деформація значно залежить від температури, швидкості деформації, хімічного складу сталі і величини зерна аустеніту. В роботі [1] відмічається, що ключовим моментом при створенні дієвої кількісної моделі динамічної рекристалізації є розробка рівнянь для визначення критичної деформації. Це потребує наявності широкої бази експериментальних даних. У більшості робіт величина критичної деформації визначається методом диференціювання кривих пластичного плину, що було вперше запропоновано у роботі [7]. У даному методі визначається напруження  $\sigma_c$  при якому має місце перегин на кривій залежності деформаційного зміцнення від напруження. Потім за знайденим значенням критичного напруження на основі вихідної кривої пластичного плину знаходиться критична деформація. Основна проблема використання цього методу полягає в тому, що прояв перегину на кривих може бути обумовленим інтенсивним динамічним поверненням, а не початком рекристалізації. Докладно цей метод описаний у роботі [2].

Згідно з даними роботи [2], навіть при піковій деформації динамічна рекристалізація знаходиться на досить ранній стадії. Аналогічне розходження рівня критичної деформації, що отриманий методом диференціювання кривих пластичного вплину з даними, що отримані на основі металографічних досліджень, відмічається в ряді робіт.

У роботі [1] вказується наявність прямої пропорційності між критичною і піковою деформаціями:

$$\varepsilon_c = \alpha \cdot \varepsilon_p \quad (2)$$

де  $\alpha$  – постійний коефіцієнт, що може становити від 0,75 до 0,90.

Моделей для розрахунку пікової деформації, на основі якої розраховують величину критичної деформації є не досить багато. У роботі [1] наводиться рівняння (3):

$$\varepsilon_p = A_\varepsilon \cdot \Psi_\varepsilon(Y_{AE}) \cdot D_{\gamma 0}^p \cdot Z^q \quad (3)$$

де  $D_{\gamma 0}$  – початковий розмір зерна аустеніту;  $Z$  – параметр Зінера-Холломона;  $\Psi_\varepsilon(Y_{AE})$  – функція хімічного складу сталі;  $p, q$  – чисельні параметри.

Для розрахунку параметру Зінера-Холломона існує наступне рівняння (4) [1]:

$$Z = \dot{\epsilon} \cdot e^{\frac{Q_d}{R \cdot E}} \quad (4)$$

де  $\dot{\epsilon}$  – швидкість деформації;  $Q_d$  – ефективна енергія активації процесу деформацій, що залежить від хімічного складу.

Існує ряд робіт, у яких наводяться формули для розрахунку пікової деформації. Наприклад, у роботі [8] спираючись на експериментальні дані отримано вираз (5):

$$\epsilon_p = 2,09 \cdot 10^{-3} \cdot (1 + 20 \cdot (w_{Nb} + 0,02 \cdot w_{Ti} + 0,18 \cdot w_{Mo})) \cdot D_{\gamma 0}^{0,147} \cdot Z^{0,155} \quad (5)$$

де  $w_X$  – вміст елементу X;  $D_{\gamma 0}$  – розмір зерна, мкм

У роботі [9] наведено дещо інші формули (6, 7):

$$\epsilon_p = 1 \cdot 10^{-4} \cdot D_{\gamma 0}^{0,5} \cdot Z^{0,096} \cdot (1,42 + 25 \cdot w_{Nb}^{eff} + 4,16 \cdot w_{Nb}^{eff 0,6})_{eff}^{0,6} \quad (6)$$

$$\epsilon_c = (0,8 + 7,21 \cdot w_{Nb}^{eff} - 2,25 \cdot w_{Nb}^{eff 0,4}) \cdot \epsilon_p \quad (7)$$

де  $w_{Nb}^{eff} = w_{Nb} + 0,33 \cdot w_{Ti}$  - ефективний вміст Nb, з поправкою на вміст Ti.

Також у даній роботі було отримано емпіричну залежність (8) енергії активації деформації від хімічного складу сталі. Розраховані на її основі значення можуть бути використані у формулі (4).

$$Q_d = 267 - 85 \cdot w_C + 48 \cdot w_{Si} + 65 \cdot w_{Mn} + 550 \cdot w_{Nb}^{eff 0,6} \text{ (кДж/моль)} \quad (8)$$

Однак невелика база вихідних даних знижує надійність вищенаведених емпіричних залежностей.

Масштабні системні експериментальні дослідження динамічної рекристалізації проведені в роботах [10 – 12]. Для розрахунку частки рекристалізованого об'єму використано вираз (9):

$$X_{DRX} = 1 - e^{-k \cdot \left( \frac{\eta - \alpha \cdot \epsilon_p}{\epsilon_p} \right)^{m'}} \quad (9)$$

де  $k, m$  – емпіричні параметри моделі, що залежать від температури, швидкості деформації і хімічного складу сталі. Значення параметру  $\alpha$  складає приблизно 0,95.

Для розрахунку параметрів  $k$  і  $m$  у роботі [12] запропоновані формули (10 і 11):

$$k = 0,5974 \cdot e^{1,2333 \left( \frac{Z}{A} \right)^{-0,5}} \quad (10)$$

$$m' = 1,0901 \cdot e^{0,264 \left( \frac{Z}{A} \right)^{0,5}} \quad (11)$$

Параметр  $A$  залежить від хімічного складу. Для нього було запропоновано наступну емпіричну залежність (12):

$$A(c^{-1}) = (12,197 + 65,59 \cdot w_C - 49,052 \cdot w_{Nb}) \cdot e^{7,07610^{-5} \cdot Q_d} \quad (12)$$

Діаметр рекристалізованого зерна, з достатньо хорошою точністю обчислюється за формулою (13) з роботи [12]:

$$D_{DRX} = 38,26 \cdot \left( \frac{Z}{A} \right)^{-0,08} \quad (13)$$

Сукупність процесів релаксаційної перебудови мікроструктури деформованого металу, що передусє рекристалізації називають поверненням. Воно не веде до утворення нових рекристалізованих зерен, але при ньому відбувається зниження щільності дислокацій, а також формування дислокаційних конфігурацій зі зниженою енергією [14]. За допомогою фізично обґрунтованих теоретичних кількісних моделей повернення описане доволі мало. Зокрема у роботі [14] наводяться рівняння (14, 15), які дозволяють описати зміну щільності дислокацій і зміну границі текучості у ході процесу повернення. Рівняння мають вигляд:

$$\sigma - \sigma_y = M \cdot \alpha_r \cdot \mu \cdot b \cdot \sqrt{\rho_d} \quad (14)$$

де  $\sigma_y$  – границя текучості;  $M$  – фактор Тейлора;  $\mu$  – модуль зсуву;  $b$  – модуль вектора Бюргерса;  $\alpha_r$  – емпіричний параметр  $\alpha_r \approx 0,15$ .

$$\frac{d(\sigma - \sigma_y)}{dt} = - \frac{64 \cdot (\sigma - \sigma_y)^2 \cdot v_d}{9 \cdot M^3 \cdot \alpha_r^2 \cdot E} \cdot e^{\frac{U}{RT}} \cdot \sinh\left(\frac{(\sigma - \sigma_y) \cdot V_a}{RT}\right) \quad (15)$$

де  $U_a$  – енергія активації процесу повернення;  $V_a$  – об'єм повернення;  $\nu_d$  – частота Дебая;  $E$  – модуль Юнга.

Після завершення деформації в металі можливі процеси статичної рекристалізації [1]. Такий вид рекристалізації розвивається, наприклад, у паузах між деформаціями при прокатці чи куванні. Зародження нових зерен, як і в більшості випадків, в ході даного процесу має місце на дефектах кристалічної будови (це на сам перед висококутові границі), поблизу яких в результаті пластичної деформації утворюються області з високими градієнтами кристалографічних орієнтувань [15]. В роботі [16] відзначається, що нові зерна зароджуються на границях вихідних, а їх ріст відбувається в сторону зерен з більш високою щільністю дислокацій. При великих деформаціях зародження рекристалізованих зерен може відбуватися також в об'ємі зерен за рахунок формування фрагментованої мікроструктури [16].

Швидкість зростання рекристалізованих зерен є фактично швидкістю переміщення їх границь [15]. Зниження рушійного тиску рекристалізації за рахунок повернення знижує швидкість зростання рекристалізованих зерен.

Кінетика статичної рекристалізації найбільш часто описується з використанням рівняння (16) [1]:

$$X_{SRX}(t) = 1 - e^{-0,693 \left(\frac{t}{t_{50}}\right)^n} \quad (16)$$

де  $X_{SRX}(t)$  – частка рекристалізованого об'єму;  $t$  – час ізотермічної витримки матеріалу після пластичної деформації;  $t_{50}$  – час рекристалізації половини об'єму;  $n$  – емпіричний параметр.

Залежність часу, за який відбувається рекристалізація половини об'єму, від температури параметрів деформації і зерна аустеніту описується рівнянням (17) [17 – 19]:

$$t_{50} = A_{SRX} \cdot \varepsilon^p \cdot \nu^q \cdot D_{\gamma 0}^s \cdot e^{\frac{Q_{SRX}}{R \cdot T}} \quad (17)$$

де  $\varepsilon$  – ступінь деформації;  $\nu$  – швидкість деформації;  $D_{\gamma 0}^s$  – розмір вихідного зерна аустенітна;  $Q_{SRX}$  – ефективна енергія активації процесу;  $A_{SRX}$ ,  $p$ ,  $q$  – емпіричні параметри.

Для значення енергії активації процесу в роботі [19] отримана емпірична залежність від хімічного складу, що має наступний вигляд (18):

$$Q_{SRX} = 148636,8 - 71981,3 \cdot w_C + 56537,0 \cdot w_{Si} + 21180,0 \cdot w_{Mn} + 121243,3 \cdot w_{Mo} + 64469,6 \cdot w_V + 109731,9 \cdot w_{Nb} \quad (\text{Дж/моль}) \quad (18)$$

де  $w_X$  – вміст елементу  $X$  (мас %).

У роботах [20 – 22] також виділяють метадинамічну рекристалізацію. Цей її вид зводиться до зростання зародків, що утворюються у процесі деформації. Метадинамічна рекристалізація практично не має інкубаційного періоду і протікає відносно швидко. На її кінетику впливають швидкість і температура деформації, практично незалежно від розміру зерна [1].

**Постановка завдань.** У роботі поставлено мету створити комп'ютерну модель, що описує кінетику процесів рекристалізації деформованого аустеніту у сталях, мікролегованих сильними карбонітридоутворюючими елементами і продемонструвати її роботу на прикладі марганцевмісної низько вуглецевої сталі мікролегованої ніобієм.

**Коротка сутність математичної моделі.** Частка об'єму, подовженого об'єму рекристалізованого металу [23] на даний момент часу описується рівнянням (19):

$$X_{ext}(t) = N_{rex} \cdot \left( \int_0^t M_{GB}^{rex} \cdot P_{rex}(\tau) \cdot dt \right)^3 \quad (19)$$

де  $N_{rex}$  – об'ємна щільність зародків ре кристалізованих зерен;  $M_{GB}^{rex}$  – рухливість границь зерен;  $P_{rex}(\tau)$  – рушійна сила («тиск») рекристалізації.

Значення дійсного об'єму ре кристалізованого металу обраховується через значення подовженого за формулою 20 з роботи [24]:

$$X(t) = 1 - \exp(-X_{ext}(t)) \quad (20)$$

Рушійна сила рекристалізації є щільністю надлишкової енергії деформованого металу, що пов'язана зі щільністю дислокацій формулою (21) з роботи [1]:

$$P_{rex}(t) = 0,5 \cdot \mu \cdot b^2 \cdot \rho_d(t) \quad (21)$$

де  $\mu$  – модуль зсуву;  $b$  – модуль вектора Бюргерса.

Щільність дислокацій сама пов'язана з об'ємом ре кристалізованого металу і обраховується за формулою (22) з роботи [1]:

$$\rho_d(t) = \alpha_{d1} \cdot \bar{\rho}_d \cdot (1 + \alpha_{d1}^{-1} \cdot \exp(-\alpha_{d2} \cdot X(t))) \quad (22)$$

$\bar{\rho}_d$  – середня щільність дислокацій;  $\alpha_{d1}$  та  $\alpha_{d2}$  – параметри моделі;  $X(t)$  – частка ре кристалізованого на даний момент часу металу.

Середня щільність дислокацій розраховувалася за формулою (23) з роботи [25]:

$$\bar{\rho}_d = \left( \frac{\sigma - \sigma_y}{\alpha_p \cdot M \cdot \mu \cdot b} \right)^2 \quad (23)$$

де  $\sigma$  – напруження пластичного плину (може бути розраховане залежно від температури і параметрів деформації);  $\sigma_y$  – межа текучості;  $M$  – фактор Тейлора;  $\alpha_p$  – параметр моделі;  $\mu$  – модуль зсуву.

Об'ємна щільність зародків рекристалізованих зерен розраховувалася за формулою (24) з роботи [23]:

$$N_{rex} = \frac{\alpha_{rex}^* \cdot P_{rex}^2(t=0)}{D_{\gamma 0}} \quad (24)$$

де  $D_{\gamma 0}$  – середній розмір вихідного зерна аустеніту;  $\alpha_{rex}^*$  – параметр моделі.

Розрахунок рухливості границь ре кристалізованих зерен розраховували за формулою (25) з роботи [1]:

$$M_{GB}^{rex}(T; Y_{AE}) = M_0^{rex} \cdot \exp\left(\frac{S_{GG}^{rex}(Y_{AE})}{R}\right) \cdot \exp\left(-\frac{Q_{GG}^{rex}(Y_{AE})}{RT}\right) \quad (25)$$

де  $S_{GG}^{rex}(Y_{AE})$  – зміна ентропії;  $Q_{GG}^{rex}(Y_{AE})$  – енергія активації процесу;

Для моделювання зміни щільності дислокацій за рахунок повернення використовували диференціальне рівняння (15).

Іншою важливою складовою розробленої математичної моделі є опис зародження і зростання частинок карбонітридів. В моделі вважалося, що дислокації, що утворюються підчас пластичної деформації однорідно розподілені по об'єму і утворюють тривимірну сітку. Вузли цієї сітки є місцями зародження карбонітридних частинок. Форма частинок приймалася для спрощення розрахунку сферичною. Вирішальним фактором для кінетики зародження і зростання цих частинок є дифузія карбідо- і нітридоутворюючих елементів (Ti, Nb, V, Zr, Al). Особливістю нашої моделі є розрахунок складу карбонітридних частинок, що здійснюється за методом, розробленим і викладеним у наших роботах [26 – 28].

Швидкість зародження карбонітридних частинок описується формулою (26) з роботи [29]:

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{nuc} = N_n \cdot Z \cdot \beta \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_c}{RT}\right) \quad (26)$$

де  $N$  – число частинок в одиниці об'єму;  $t$  – час;  $N_n$  – об'ємна щільність потенційних місць зародження;  $Z$  – фактор зельдовича;  $\beta$  – швидкість приєднання атомів карбонітридоутворюючого елементу до зародка критичного розміру;  $\Delta G_c$  – термодинамічний бар'єр зародження;  $T$  – температура;  $R$  – газова постійна.

Фактор  $\beta$  обчислюється за формулою (27) з роботи [30]:

$$\beta = \frac{4 \cdot \pi \cdot R_c^2 \cdot D \cdot X}{a_\gamma^4} \quad (27)$$

де  $D$  – коефіцієнт дифузії атомів карбонітридоутворюючого елементу в аустеніті;  $X$  – молярна концентрація карбонітридоутворюючого елементу в аустеніті на даний час;  $a_\gamma$  – параметр ґратки аустеніту;  $R_c$  – радіус зародка.

Коефіцієнт дифузії і параметр ґратки залежать від температури і хімічного складу. Радіус критичного зародку визначається формулою (28) з роботи [31]:

$$R_c = -\frac{2\gamma_{p/\gamma}}{\Delta G_p} \quad (28)$$

де  $\gamma_{p/\gamma}$  – питома енергія поверхні розділу частка/матриця.

Фактор Зельдовича виражає питому енергію Гіббса, що припадає на елементарний об'єм сполуки карбонітриду, необхідний для визначення його стехіометричного складу [31].

Згідно роботі [32] початкове значення щільності місць зародження дисперсних частинок пов'язане з щільністю дислокацій співвідношенням (29):

$$N_{n0} = 0,5 \cdot \rho_d^{1,5} \quad (29)$$

Поточна кількість потенційних місць зародження падає по мірі проходження процесу утворення частинок.

Процес зростання частинок можна поділити на два етапи. На першому етапі зростання йде за рахунок притоку нового матеріалу з твердого розчину. По мірі вичерпування карбонітридоутворюючих елементів у твердому розчині і наближення стану до рівноваги включаються процеси остальдівського дозрівання – збільшення розміру крупніших частинок за рахунок переходу до них речовини з дрібніших. На першому етапі може спостерігатися збільшення кількості частинок (якщо потенційні місця зародження ще не вичерпано). На другому етапі загальна кількість частинок зменшується.

Швидкість зростання частинки на першому етапі описується рівнянням (30) з роботи [23]:

$$\left. \frac{dR}{dt} \right|_{nuc1} = \frac{D_{eff}}{R} \cdot \frac{X - X_{eq} \cdot \exp\left(\frac{R_0}{R}\right)}{\alpha_p \cdot X_p - X_{eq} \cdot \exp\left(\frac{R_0}{R}\right)} + \frac{1}{N} \cdot \frac{dN}{dt} \cdot (R_c^* - R) \quad (30)$$

де  $X$  – фактична молярна концентрація карбонітридоутворюючого елементу в аустеніті;  $X_{eq}$  – рівноважна молярна концентрація карбонітридоутворюючого елементу в аустеніті;  $X_p$  – молярна частка атомів карбонітридоутворюючого елементу у сполуці;  $\alpha_p$  – відношення атомних об'ємів в аустеніті і частинці корбо нітриду;  $R_0$  – капілярний радіус;  $R_c^*$  – ефективний критичний радіус.

В моделі вважалося, що ефективний коефіцієнт дифузії  $D_{eff}$  має дві складові – об'ємна дифузія і дислокаційна (трубочна) дифузія. Таким чином, ефективний коефіцієнт дифузії обчислюється за формулою (31):

$$D_{eff} = \pi \cdot R_d^2 \cdot \rho_d \cdot D_{pipe} + (1 - \pi \cdot R_d^2 \cdot \rho_d) \cdot D \quad (31)$$

де  $D_{pipe}$  – коефіцієнт дислокаційної дифузії;  $D$  – коефіцієнт об'ємної дифузії;  $R_d$  – радіус ядра дислокації.

На стадії остальдівського дозрівання зміна середнього радіусу дисперсних частинок описується рівнянням (32), а супутнє зменшення їх кількості рівнянням (33) з роботи [31]:

$$\left. \frac{dR}{dt} \right|_{coars} = \frac{4}{27} \cdot \frac{X}{\alpha_p \cdot X_p - X_{eq}} \cdot \frac{R_0 D_{eff}}{R^2} \quad (32)$$

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{coars} = \frac{4}{27} \cdot \frac{X}{\alpha_p \cdot X_p - X_{eq}} \cdot \frac{R_0 \cdot D_{eff}}{R^3} \cdot \left[ \frac{R_0 X}{R \cdot (X_p - X_{eq})} \cdot \left( \frac{3}{4 \cdot \pi \cdot R^3} - N \right) - 3 \cdot N \right] \quad (33)$$

Як зазначалося раніше, виділення карбонітридних частинок впливає на хід процесу рекристалізації. Це обумовлено декількома причинами. По-перше, падіння у твердому розчині концентрації карбонітридоутворюючих елементів і вуглецю за рахунок виділення частинок змінює ефективну рухливість границь зерен. По-друге, виділення дисперсних частинок змінює рушійний «тиск» рекристалізації. Це виражається формулою (34) з роботи [1]:

$$P_{rex}^*(t) = P_{rex}(\rho_d(t)) - P_Z(t)$$

де  $P_Z(t)$  – тиск Зинера, що має вигляд (35):

$$P_Z(t) = \frac{3 \cdot \gamma_{GB} \cdot f(t)}{R(t)}$$

де  $f(t)$  – об'ємна частка частинок карбонітриду;  $R(t)$  – середній радіус частинок;  $\gamma_{GB}$  – питома енергія границь ре кристалізованих зерен.

По-третє, утворення дисперсних частинок на дислокаціях призводить до їх закріплення, що гальмує процес повернення. Так, швидкість повернення знижується з ростом числа вузлів, зайнятих частинкою крабонітриду і стане нульовою, у разі якщо всі вузли будуть зайняті.

Представлена вище формалізація є лише коротким оглядом розробленої моделі, що не вдається у подробиці розрахунку окремих параметрів, що входять у рівняння, і застосування методів обчислювальної математики для реалізації розрахунків. Але вона дає загальне уявлення про прийнятий підхід.

Приклад розрахунку за розробленою математичною моделлю. Розглянемо процеси рекристалізації при гарячій деформації сталі, склад якої наведено в у таблиці 1. Розгадалися випадки деформації при 1000 і 900 °С. Ступінь деформації була прийнята 30 %, швидкість деформації становила  $3,5 \text{ с}^{-1}$ . Розмір початкового зерна аустеніту складав 120 мкм. Моделювання проводилося з кроком за часом, що дорівнював 0,1 с.

Таблиця 1.

Хімічний склад сталі (мас. %)

Fe	C	Mn	Si	Mo	Ti	V	Nb	Zr	Al	N
основа	0,1	1,20	0,25	0,01	0,015	0,02	0,045	0,002	0,002	0,006

На рисунку 1 наведені отримані в результаті моделювання кінетичні криві, що показують зміну частки ре кристалізованого металу з плином часу. Ми бачимо, що при більш високій температурі (1000 °С) процес рекристалізації завершується набагато швидше – приблизно за 100 с. При температурі 900 °С даний процес потребує для свого завершення майже в чотири рази більше часу.

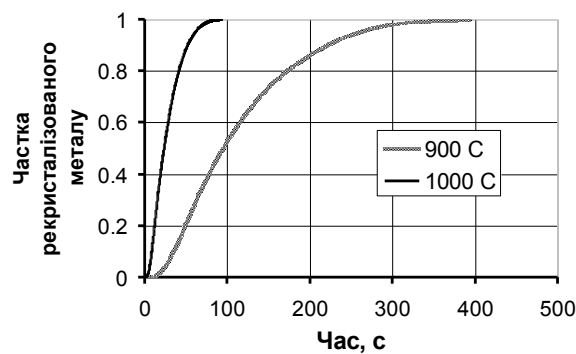


Рис. 1. Кінетика рекристалізації аустеніту при 900 °С і 1000 °С

Теж саме стосується і кінетики повернення (рисунку 2). В обох випадках можна зазначити уповільнення процесу з плином часу – крива стає більш пологою. При більш низькій температурі (вважається що деформація відбувається при ній) створюється майже у півтора рази більша початкова щільність дислокацій.

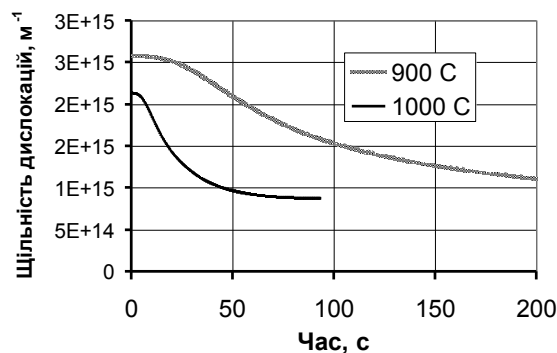


Рис. 2. Кінетика повернення при 900 °С і 1000 °С

Як зазначалося раніше, саме процеси рекристалізації деформованого аустеніту лежать в основі механізму подрібнення зерна в ході деформаційно-термічної обробки. Результат моделювання даного явища наведено на рисунку 3. Криві мають характер уповільнення з плином часу. Особливо це видно на кривій, що відповідає більш високотемпературному процесу. Доходячи до розміру близько 70 мкм подальше подрібнення суттєво уповільнюється.

Модель також дозволяє отримати результати щодо кінетики виділення карбонітридних частинок. З термодинамічного розрахунку слідує, що в даній сталі при вказаних температурах можливо утворення карбонітридів ніобію і титану, незначної кількості нітридів цирконію і алюмінію (вміст цих елементів у твердому розчині дуже малий). Приблизний склад карбонітридів, що утворюються при 900 °С становить  $\text{NbC}_{0,81}\text{N}_{0,19}$  та  $\text{TiC}_{0,58}\text{N}_{0,42}$ . При 1000 °С утворюються

карбонітриди наступного складу:  $\text{NbC}_{0,39}\text{N}_{0,61}$  та  $\text{TiC}_{0,14}\text{N}_{0,86}$ . Нижче кінетика виділення проілюстрована тільки для карбонітридів титану і ніобію як основних.

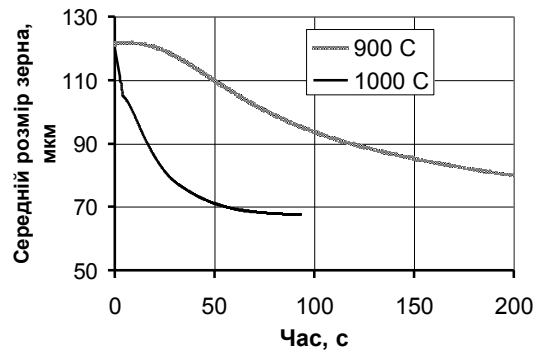


Рис. 3. Зміна середнього розміру зерна в ході рекристалізації деформованого аустеніту при 900 °C і 1000 °C

На рисунку 4 показано зміну з плином часу кількості частинок карбонітридів титану і ніобію в одному  $\text{м}^3$  матеріалу. Так ми бачимо, що при нижчій температурі утворюється значно більша кількість частинок. Кількість частинок  $\text{Nb}(\text{CN})$  майже на порядок більша. Це обумовлено, з одного боку, більшим вмістом ніобію у твердому розчині на початку процесу, з іншого боку, дрібнішими частками  $\text{Nb}(\text{CN})$  – рисунок 5. Збільшення кількості частинок, що виділяються при зниженні температури обумовлюється, по-перше, більшим пересиченням твердого розчину, що веде до більш інтенсивного зародкоутворення, по-друге, повільнішим зростанням частинок – матеріал скоріше іде на утворення нової частинки ніж на зростання вже існуючої.

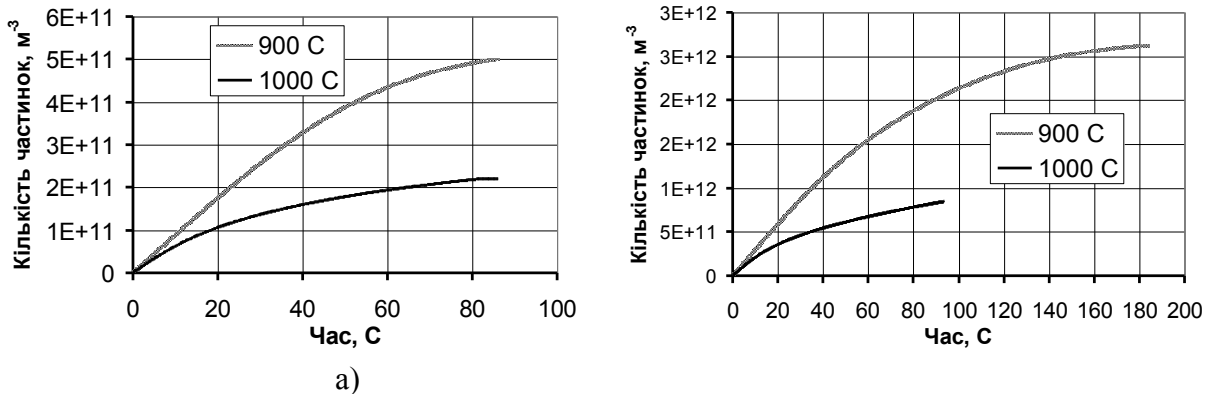


Рис. 4. Зміна з плином часу кількості частинок  $\text{Ti}(\text{CN})$  – (а) та  $\text{Nb}(\text{CN})$  – (б) при 900 °C і 1000 °C

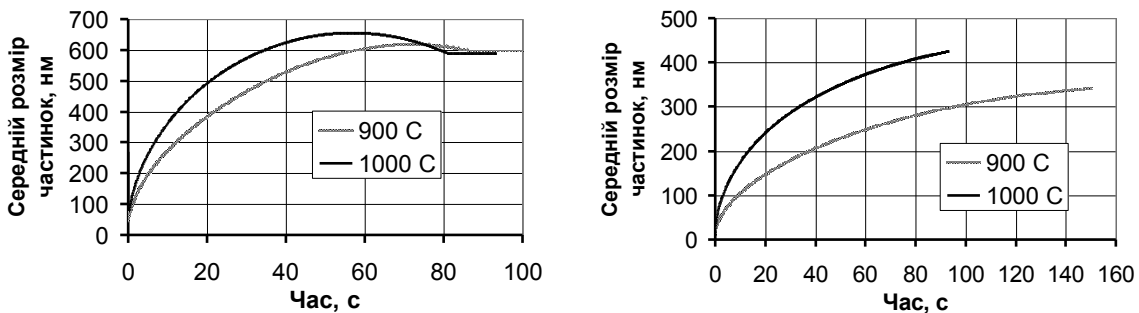


Рис. 5. Зміна з плином часу середнього розміру частинок  $\text{Ti}(\text{CN})$  – (а) та  $\text{Nb}(\text{CN})$  – (б) при 900 °C і 1000 °C

Як видно з рисунку 5, при нижчій температурі зростання частинок йде повільніше. У випадку  $\text{Nb}(\text{CN})$  це приводить до формування дрібніших частинок. Результуючий середній розмір



частинок Ti(CN) майже не відрізняється при обох температурах. Але такий результат обумовлений в першу чергу інтенсивним утворенням частинок Ti(CN) на кінцевих етапах виділення при 1000 °C при одночасному уповільненні зростання. Це в свою чергу привело до деякого зменшення середнього розміру частинок Ti(CN). Слід зазначити, що мова йде про зменшення середнього розміру частинок, це не означає що частинки зменшувалися, просто з'являлася велика кількість дрібніших частинок. Частинки Nb(CN) виходять дещо дрібнішими ніж частинки Ti(CN), особливо при нижчій температурі.

#### **Висновки.**

Розроблено комп'ютерну модель, що дозволяє розрахувати хід процесів повернення і рекристалізації деформованого аустеніту у сталях, комплексно мікролегованих сильними карбонітридоутворюючими елементами. Модель також дозволяє отримати характеристики структури і інформацію про кінетику зародження і зростання карбонітридних частинок.

За допомогою розробленої моделі проведено приклад розрахунку рекристалізації у низьковуглецевій мікролегованій сталі з підвищеним вмістом марганцю. Прдемонстровано моделювання впливу температури на рекристалізацію, повернення і утворення карбонітридних частинок. Показано, що при збільшенні температури процеси рекристалізації і повернення ідуть швидше, в той же час, більш низькі температури дозволяють отримати більш дисперсний карбонітрид ніобію. Показано, що ніобій, особливо при низькій температурі, утворюю майже вдвічі дрібніші карбонітридні частинки у порівнянні з титаном. Температура виділення суттєво впливає на склад карбонітридів титану і ніобію – при зниженні температури в них зростає частка вуглецю. Отримані результати не суперечать відомим фактам.

Застосування даної моделі представляється корисним при розробці і аналізі процесів деформаційно-термічної обробки мікролегованих сталей.

#### **Список використаних джерел:**

1. Соколов С. Ф. Исследование и моделирование эволюции микроструктуры и сопротивления деформации сталей при горячей обработке давлением: дис. канд. техн. наук: 05.16.05, 05.16.01 / Соколов Семён Фёдорович – Санкт-Петербург, 2013. – 216 с.
2. Pereda B. Effect of Mo on Dynamic Recrystallization Behavior of Nb–Mo Microalloyed Steels / B. Pereda, A.I. Fernandez, B. Lopez, J.M. Rodriguez // ISIJ Int. – 2007. – V. 47. – №6. – P. 860–868.
3. Jonas J.J. The Avrami kinetics of dynamic recrystallization / J.J. Jonas, X. Quelenec, L. Jiang, E. Martin // Acta Mater. – 2009. – V. 57. – P. 2748–2756.
4. Quelenec X. A New Approach to Modelling the Flow Curve of Hot Deformed Austenite / X. Quelenec, N. Bozzolo, J.J. Jonas, R. Loge // ISIJ Int. – 2011. – V. 51. – №6. – P. 945–950.
5. Jafari M. Correlation between Zener-Hollomon parameter and necklace DRX during hot deformation of 316 stainless steel / M. Jafari, A. Najafizadeh // Mater. Sci. Eng. A. – 2009. – V. 501. – P. 16–25.
6. Zhang. Z. The effect of Nb on recrystallization of a Nb micro-alloyed steel / Z. Zhang., Y. Liu, X. Liang, S. Yuan // Mater. Sci. Eng. A. – 2008. – V. 474. – P. 254–260.
7. Ryan N. D., McQueen H. J. // Can. Metall. Q. –1990.–V.29.– P.147.
8. Fernandez A.I Dynamic recrystallization behavior covering a wide austenite grain size range in Nb and Nb-Ti microalloyed steels / A.I. Fernandez, P. Uranga, B. Lopez, J.M. Rodriguez-Ilabe // Mater. Sci. Eng. A. – 2003. – V. 316. – P. 367–376.
9. Liqiang M. Dynamic Recrystallization Behavior of Nb-Ti Microalloyed Steels / M. Liqiang, L. Zhenyu, J. Sihai, Y. Xiangqian // Journal of Wuhan University of Technology. – 2009. – P. 190–196.
10. Medina S.F. Modeling of the Dynamic Recrystallisation of Austenite in Low Alloy and Microalloyed Steels / S.F. Medina, C.A. Hernandez // Acta Mater. – 1996. – V. 44. – P. 165–171.
11. Medina S.F. The Influence of Chemical Composition on Peak Strain of Deformed Austenite in Low Alloy and Micro-alloyed Steels / S.F. Medina, C.A. Hernandez // Acta Mater. – 1996. – V. 44. – №1. – P. 149–155.
12. Medina S.F. General Expression of the Zener-Hollomon Parameter as a Function of the Chemical Composition of Low Alloy and Micro-alloyed Steels / S.F. Medina, C.A. Hernandez // Acta Mater. – 1996. – V. 44. – №1. – P. 137–148.
13. Золоторевский Н. Ю. Моделирование структурных превращений в металлических материалах / Н. Ю. Золоторевский // СПбГПУ. – 2007. – 164 с.
14. Verdier M. Recovery of AlMg alloys: flow stress and strain-hardening properties / M. Verdier, Y. Brechet, P. Guyot // Acta Mater. – 1999. – V. 47. – №1. – P. 127–134.
15. Горелик С. С. Рекристаллизация металлов и сплавов / С. С. Горелик – Москва: Металлургия, 1978, 248 с.
16. Lefevre-Schlick F., Brechet Y., Zurob H.S., Purdy G., Embury D. On the activation of recrystallization nucleation sites in Cu and Fe // Mater. Sci. Eng. A. – 2009. – V. 502. – P.70–78.

17. Medina H.S. Determination precipitation-time temperature (PTT) diagrams for Nb, V and Ti microalloyed steels / H.S. Medina // *J. Mater. Sci.* – 1997. – V. 32. – P. 1487–1492.
18. Medina H.S. Static Recrystallization Modelling of Hot Deformed Steels Containing Several Alloying Elements / H.S. Medina, J.E. Mancilla // *ISIJ Int.* – 1996. – V. 36. – №8. – P. 1070–1076.
19. Medina H.S. Improved Model for Static Recrystallization Kinetics of Hot Deformed Austenite in Low Alloy and Nb/V Micro-alloyed Steels / H.S. Medina, A. Quispe // *ISIJ Int.* – 2001. – V. 41. – №7. – P. 774–781.
20. Cho S., Kang K., Jonas J.J. The Dynamic, Static and Metadynamic Recrystallization of a Nb-microalloyed Steel // *ISIJ Int.* – 2000. – V. 36. – №9. – P. 914–921.
21. Sun W.P., Hawbolt E.B. Comparison between Static and Metadynamic Recrystallization – An Application to the Hot Rolling of Steels // *ISIJ Int.* – 1997. – V. 37. – №10. – P. 1000–1009.
22. Beladi H., Cizek P., Hodgson P.D. New insight into the mechanism of metadynamic softening in austenite // *Acta Mater.* – 2011. – V. 59. – P. 1482–1492.
23. Zurob H.S. A model for the competition of precipitation and recrystallization in deformed austenite / H.S. Zurob, Y. Brechet, G. A. Purdy // *Acta Mater.* – 2001. – V. 49. – P. 4183–4190.
24. Grong O. Metallurgical modeling of welding / O. Grong // *Materials Modeling Series, The Institute of Materials.* – 1997. – 605 p.
25. Verdier M. Recovery of AlMg alloys: flow stress and strain-hardening properties / M. Verdier, Y. Brechet, P. Guyot // *Acta Mater.* – 1999. – V. 47. – №1. – P. 127–134.
26. Троцан А. И. Прогнозирование выделения карбонитридов и карбидов в микролегированной стали с применением термодинамических расчётов / А. И. Троцан, В. В. Каверинский, И. Л. Бродецкий // *Металлофизика и новейшие технологии.* – 2013. – № 7. – С. 919 – 931.
27. Троцан А. И. Моделирование карбонитридообразования в микролегированных сталях. Сообщение 1: сущность математической модели; влияние температуры изотермической выдержки на усреднённый состав и количество избыточной фазы / А. И. Троцан, В. В. Каверинский, И. Л. Бродецкий // *Металл и литьё Украины.* – 2014. – №2. – С. 9 – 13.
28. Троцан А. И. Моделирование карбонитридообразования в микролегированных сталях. Сообщение 2: прогнозирование влияния варьирования содержания Al, Ti и Nb на выделение карбидов и нитридов в стали / А. И. Троцан, В. В. Каверинский, И. Л. Бродецкий // *Металл и литьё Украины.* – 2014. – №3. – С. 3 – 8.
29. Kampmann R. A Combined Cluster-Dynamic and Deterministic Description of Decomposition Kinetics of Binary Alloys with a Tendency for Clustering / R. Kampmann // *Phys. Stat. Sol. (b).* – 1992. – V. 172. – P.295 – 308.
30. Zurob H.S. Modeling recrystallization of microalloyed austenite: effect of coupling recovery, precipitation and recrystallization / H.S. Zurob, C.R. Hutchison, Y. Brechet, G. Purdy // *Acta Mater.* – 2002. – V. 50. – P. 3075 – 3092.
31. Perez M. Implementation of classical nucleation and growth theories for precipitation / M. Perez, N. Dumont, D. Acevedo-Reyes // *Acta Mater.* – 2008. – V. 56. – P. 2119–2132.
32. Dutta B. Modelling the kinetics of strain induced precipitation in Nb microalloyed steels / B. Dutta, E.J. Palmiere, C.M. Sellars // *Acta Mater.* – 2001. – V. 49. – P. 785–794.

Стаття надійшла до редакції 10.05.2019